

02;12
©1993

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ КВАЗИМОЛЕКУЛ H^o-He, H^o-H₂ ПО ДАННЫМ ОБ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ ЭЛЕКТРОНОВ

Г.Н.Огурцов, А.Г.Крупышев, Ю.С.Гордеев

Адиабатическое рассмотрение процессов прямой ионизации [1,2] дает простое выражение для энергетического распределения электронов:

$$\mathfrak{S}' = \frac{d\mathfrak{S}}{dE} = A(E) \exp \left[-\frac{\alpha(E)}{V} \right], \quad (1)$$

в котором зависимость от скорости заключена только в показателе экспоненты. Это создает возможность путем анализа экспериментальных данных об энергетических спектрах электронов определить параметры квазимолекул, содержащиеся в функции $\alpha(E)$:

$$\alpha(E) = 2 \int_{E_0}^E \text{Im} R(E') dE' = \alpha_0(E)(E - E_0), \quad (2)$$

$$\alpha_0(0) = 2\text{Im} R(0), \quad (3)$$

где E — энергия испускаемого электрона, E_0 — энергия ионизуемого уровня квазимолекулы в пределе $R \rightarrow 0$, а вещественная и мнимая компоненты межъядерного расстояния $R(0)$ в точке пересечения выдвигающегося адиабатического терма с границей континуума связаны простыми соотношениями с эффективным зарядом $Z_{\text{эф}}$ и угловым моментом l уровня объединенного атома [2].

Пары H^o-He и H^o-H₂, выбранные нами для исследования, важны для проверки теории по нескольким причинам. Во-первых, единственным каналом образования электронов с непрерывным распределением по энергии в данном случае является прямая ионизация. Во-первых, ионизация происходит путем выдвигения в континуум адиабатической орбитали $2p\mathfrak{S}$, коррелирующей с уровнем $1s$ атома водорода и содержащей один электрон. Наконец, выдвигающаяся орбиталь $2p\mathfrak{S}$ заселена до столкновения с вероятностью 1. Таким образом, многие условия, при

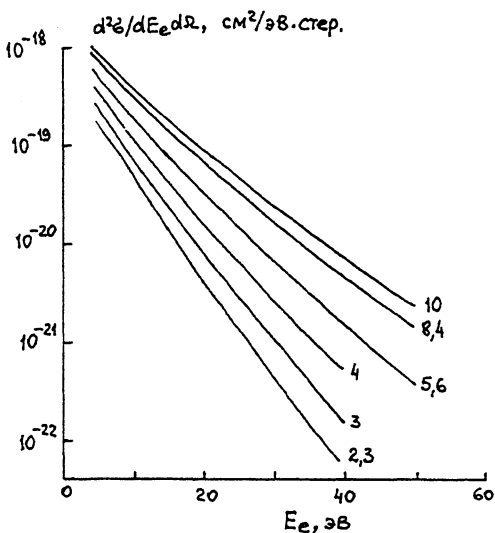


Рис. 1. Энергетические распределения электронов, образующихся при столкновениях H^0 -He. Цифры около кривых обозначают энергии атомов водорода в кэВ.

которых производилось теоретическое рассмотрение (одно-электронное приближение, отсутствие конкурирующих каналов, начальные условия), можно считать выполненными. Вместе с тем, имеются и отличия, связанные с тем, что поле остова, в котором находятся электроны в момент ионизации, не является чисто кулоновским, и нам предоставляется возможность проверить применимость теории в случае экранированного кулоновского потенциала и молекулярной мишени.

Энергетические спектры электронов были измерены на экспериментальной установке [3], основным элементом которой является энергоанализатор типа "цилиндрическое зеркало" с углом входа 54.5° и разрешением $\Delta E/E = 0.6\%$. Измерения выполнены в интервале энергий ударяющих атомов $2.3 = 10$ кэВ, ток атомов регистрировался с помощью метода вторичной электронной эмиссии. В эксперименте определялись двойные дифференциальные сечения $\mathcal{S}'' = d^2\mathcal{S}/dE d\Omega$, однако, как показывает анализ имеющихся литературных данных об угловом распределении, сечения $\mathcal{S}''(54.5^\circ)$ и \mathcal{S}' отличаются лишь постоянным множителем, близким к 4π .

Пример спектров для пары H^0 -He (за вычетом автоионизационной структуры) приведен на рис. 1. Он имеет типичный экспоненциальный характер, соответствующий пред-

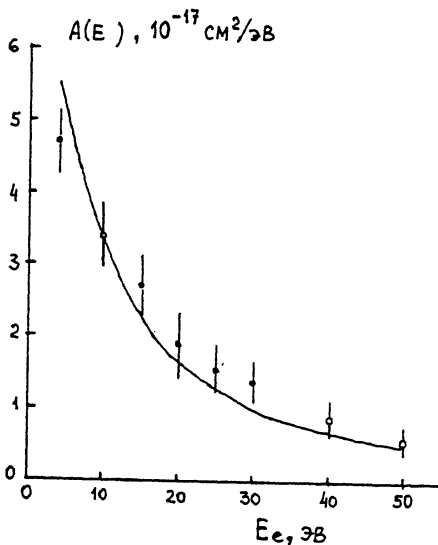


Рис. 2. Предэкспоненциальный фактор $A(E)$ для прямой ионизации с орбитали $2p\sigma$ квазимолекулы $\text{H}^{\circ}\text{-He}$. Точки — эксперимент, сплошная линия — расчет по формуле (6).

сказаниям теории. Спектры для пары $\text{H}^{\circ}\text{-H}_2$ имеют аналогичную форму.

При определении параметров квазимолекул использовались следующие соотношения:

$$\alpha(E) = \ln \left[\frac{\sigma'(E, V_1)}{\sigma'(E, V_2)} \right] (V_2^{-1} - V_1^{-1})^{-1}, \quad (4)$$

$$E_0^2 - mE_0 + p = 0, \quad (5)$$

где коэффициенты m и p выражаются через параметры α и энергии в точках справа и слева от некоторого значения E_i , вблизи которого функция $\alpha(E)$ раскладывается в ряд Тейлора. Мы не приводим эти выражения из-за их громоздкости.

Отметим две важные особенности используемого метода. Во-первых, в формулу (4) входят не абсолютные, а относительные величины сечений, которые могут быть измерены с высокой точностью. Во-вторых, можно установить не только некоторое среднее значение энергии уровня E_0 , но и интервал допустимых значений, который определяется максимальным и минимальным значениями эффективного заряда, возможными для конкретного объединенного атома. Перед определением параметров мы производим сглаживание экспериментальных сечений по энергии электронов и обратной скорости.

Система	Уровень	$-E_0$, эВ	$Z_{эф}$	$\text{Re}R(0)$, а.е.	$\text{Im}R(0)$, а.е.
$\text{H}^\circ\text{-He}$	$2p\mathcal{S}$	3.4 ± 0.6	1.0	1.75	2.05
$\text{H}^\circ\text{-H}_2$	" $2p\mathcal{S}$ "	1.6 ± 0.5	1.0	1.70	2.00

На рис. 2 приведены значения предэкспоненциального фактора $A(E)$, определенные из экспериментальных данных об абсолютных дифференциальных сечениях для пары $\text{H}^\circ\text{-He}$. Наилучшее согласие с экспериментом дает расчет по формуле

$$A(E) = 4\pi \{\text{Re}R(E)\}^2 \text{Im}R(E)\alpha^{-1}(E), \quad (6)$$

которая отличается от теоретической [2] заменой $|R(E)|^2 \rightarrow \{\text{Re}R(E)\}^2$. Аналогичная ситуация имеет место для пары $\text{H}^\circ\text{-H}_2$.

В таблице приведены впервые полученные нами значения параметров квазимолекул $\text{H}^\circ\text{-He}$ и $\text{H}^\circ\text{-H}_2$.

Как видно из таблицы, параметры квазимолекул $Z_{эф}$, $\text{Re}R(0)$, $\text{Im}R(0)$ практически совпадают, в то время как значения E_0 существенно различаются. Если для квазимолекулы $\text{H}^\circ\text{-He}$ это значение хорошо согласуется с энергией связи уровня $2p$ объединенного атома Li (3.54 эВ), то для изоэлектронной трехатомной системы $\text{H}^\circ\text{-H}_2$ оно почти в два раза меньше. Подобная ситуация наблюдалась ранее для столкновения $\text{H}^+\text{-He}$ и $\text{H}^+\text{-H}_2$ [4].

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы.

1. Теоретический подход, основанный на использовании аналитических свойств термов квазимолекул, может быть распространен на системы с экранированным кулоновским полем; таким образом, круг объектов электронной спектроскопии квазимолекул существенно расширяется.

2. Наиболее важной для прямой ионизации в системе атом (ион)-гомоядерная двухатомная молекула является не окрестность отдельного атома, а область вблизи центра масс молекулы мишени. В этой области происходит выдвигание поверхностей потенциальной энергии в системах с группой симметрии C_{2v} [5], которая и объясняет уменьшение значений $|E_0|$, наблюдаемое в настоящей работе.

Список литературы

- [1] Соловьев Е.А. // ЖЭТФ. 1976. Т. 181. В. 81. С. 1681-1692.
- [2] Овчинников С.Ю., Соловьев Е.А. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. С. 477-484.
- [3] Огурцов Г.Н., Флакс И.П., Авакян С.В. // ЖТФ. 1969. Т. 39. С. 1293-1301.
- [4] Огурцов Г.Н., Саргсян Н.Г., Овчинников С.Ю., Гордеев Ю.С. // Физика электронных и атомных столкновений. 1989. Т. 11. С. 183-194.
- [5] Sidis V., Doweck D. // XIII ICPEAC Invited Papers. Berlin, 1983. P. 403-414.

Физико-технический институт
им.А.Ф.Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
23 сентября 1993 г.
